

**A UCS É
PRA VOCÊ
QUE CRIA O
FUTURO.**



**XXIX Encontro de Jovens Pesquisadores
e XI Mostra Acadêmica de Inovação e Tecnologia**

De 5 a 7/10

Local: UCS - Cidade Universitária,
Caxias do Sul

jovenspesquisadores.com.br



FUNDAÇÃO
UNIVERSIDADE DE
CAXIAS DO SUL

UCS
UNIVERSIDADE
DE CAXIAS DO SUL

Equações de estado para sólidos e a correlação entre o módulo volumétrico e sua primeira derivada em relação à pressão

PIBIC/CNPq

PROJETO FISMAT

Lucas da Rosa Silva, Laura H. Tessari Braz, Giovanni L. Rech, Cláudio A. Perottoni

lrsilva28@ucs.br, caperott@ucs.br



Grupo de Pesquisa em
Física de Materiais e
Cerâmicas Avançadas

INTRODUÇÃO

Uma equação de estado (EOS) é um modelo matemático que relaciona as grandezas de estado termodinâmico (pressão, volume e temperatura) e permite descrever o comportamento volumétrico de um sistema físico sujeito a diferentes condições experimentais.

Dentre as EOSs, existem as equações de estado sólido isotérmicas que apresentam como parâmetros o módulo volumétrico (*bulk modulus*) B_0 , a sua primeira derivada em relação à pressão, B_0' , e V_0 , o volume a $P=0$.

A alta correlação entre parâmetros ajustados de um modelo matemático pode aumentar significativamente a incerteza desses parâmetros, por isso é importante encontrar meios de reduzi-la.

OBJETIVO

Ajustar a equação de estado de Rose-Vinet na descrição do comportamento volumétrico do ouro (Au) e avaliar a correlação entre os parâmetros B_0 e B_0' obtidos da EOS original e da sua forma linearizada.

METODOLOGIA

Para a análise de dados foi utilizado a linguagem Python [1] por meio do ambiente computacional Google Collaboratory [2]. Os dados experimentais de pressão *versus* volume da cela unitária para o ouro (Au) foram obtidos da literatura [3].

Utilizou-se o pacote LMFIT para o ajuste da equação de estado de Rose-Vinet aos dados experimentais. A equação de Rose-Vinet [4] descreve a pressão P de um material com o seu volume V e é dada por

$$P = 3B_0 \left(\frac{1-\eta}{\eta^2} \right) e^{\frac{3}{2}(B_0'-1)(1-\eta)} \text{ sendo, } \eta = \left(\frac{V}{V_0} \right)^{\frac{1}{3}} \quad (1)$$

onde B_0 , B_0' são, respectivamente, o módulo volumétrico e a sua derivada em relação a pressão, e V_0 é o volume a pressão nula. Os parâmetros livres (B_0 , B_0' e V_0) são ajustados a fim de minimizar uma função custo dada por

$$\sum (P_{\text{vinet}} - P_{\text{experimental}})^2 \quad (2)$$

Curvas de nível da função custo foram então utilizadas para visualizar a correlação entre B_0 e B_0' . Para a redução da correlação entre os parâmetros, obteve-se os mesmos parâmetros a partir da forma linearizada de EOS, com a conversão para as variáveis f_v e F_v

$$f_v = 1 - \left(\frac{V}{V_0} \right)^{\frac{1}{3}} \quad (3)$$

$$F_v = \log \left(\frac{P(1-f_v)^2}{3f_v} \right) \quad (4)$$

RESULTADOS E DISCUSSÃO

A relação experimental entre pressão e volume com a equação de estado ajustada na sua forma original e linearizada são mostrados, respectivamente, nas Figuras 1 e 2. A curva de nível da função custo é mostrada na Figura 3.

Nas Tabelas 1 encontram-se os valores da correlação entre os parâmetros nas situações discutidas.

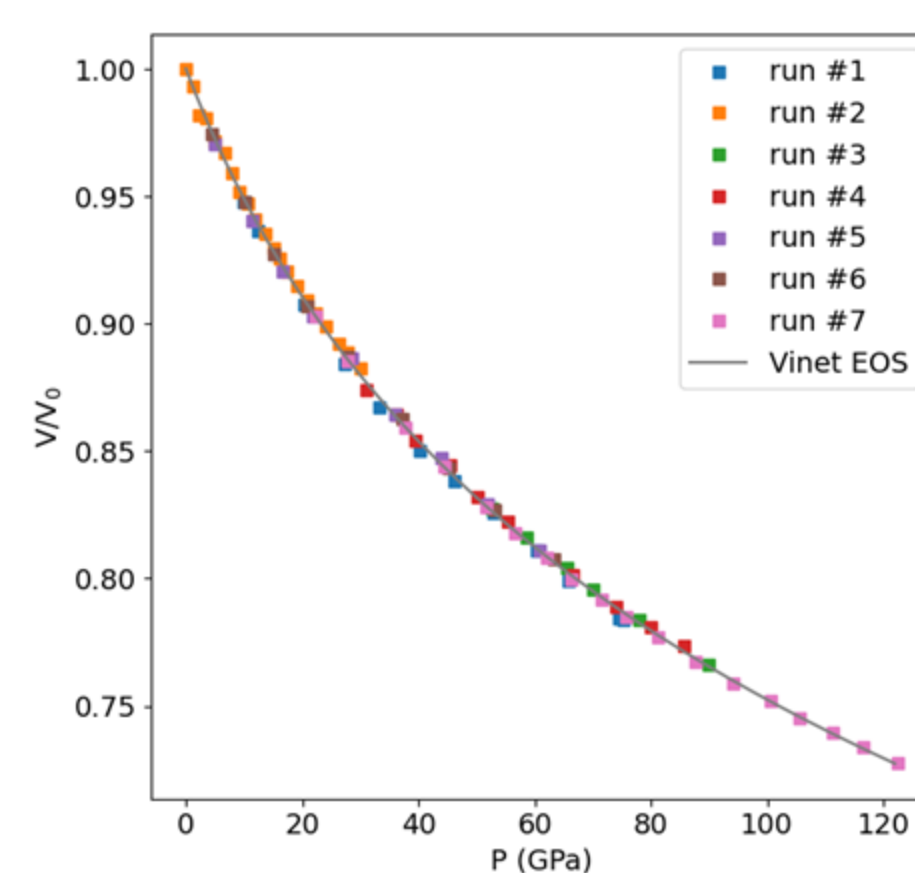


Figura 1. Relação pressão-volume para o ouro com EOS ajustada.

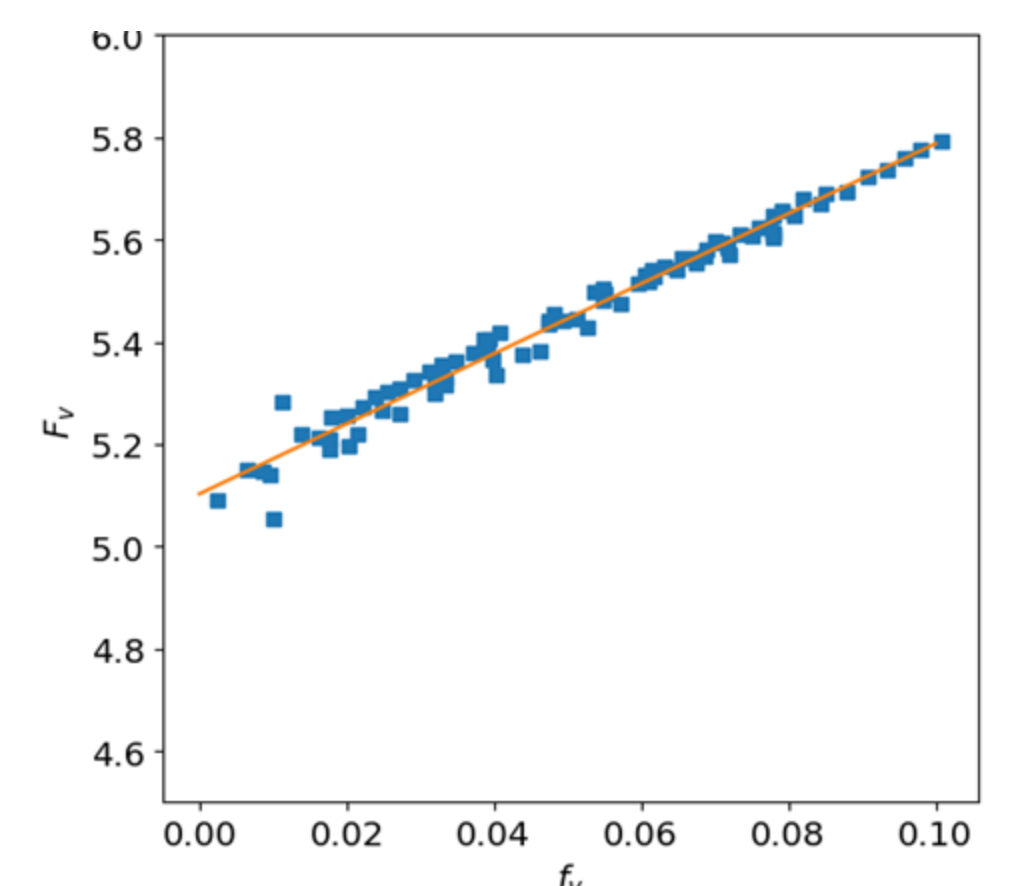


Figura 2. Relação entre as variáveis f_v e F_v com ajuste linear

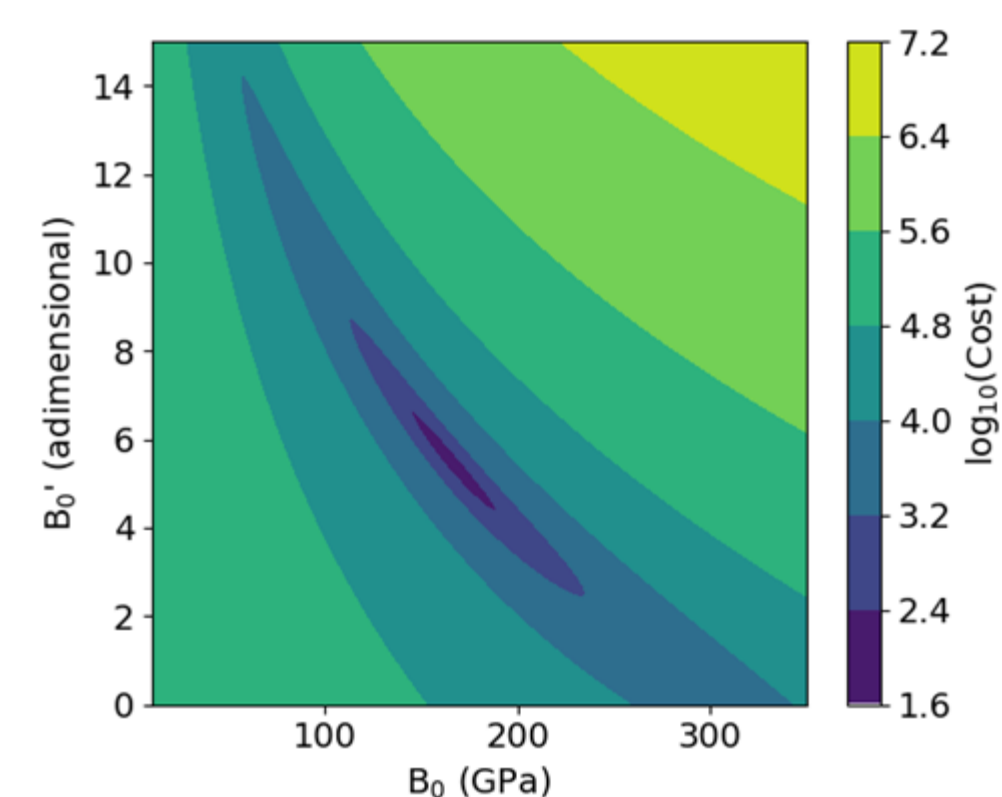


Figura 3. Mapa de correlação entre os parâmetros B_0 e B_0' .

Parâmetros	Valor
B_0 e B_0'	0.9764
f_v e F_v	0.8620

Tabela 1. Valores das correlações

Com o processo de linearização da Equação de Estado percebe-se que a correlação diminuiu, uma vez que as características dos modelos lineares são conhecidos e facilmente interpretados.

CONCLUSÃO

Os parâmetros B_0 e B_0' são altamente correlacionados, mesmo quando a equação de estado é linearizada mediante mudança de variáveis, conforme descrito. Diante disso, uma alternativa para a redução desta correlação entre os parâmetros é utilizar dados para o ouro obtidos por cálculos DFT (*Density Functional Theory*), abordagem ainda em fase de estudo.

Os cálculos DFT tornam possível obter informações de energia e volume para valores positivos e negativos para a pressão e, possivelmente, reduzir a correlação entre os parâmetros B_0 e B_0' .

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] PYTHON. 2021. Disponível em: <https://www.python.org/>. Acesso em: 27 ago. 2021.
- [2] GOOGLE Collaboratory. 2021. Disponível em: <https://colab.research.google.com/notebooks/intro.ipynb>. Acesso em: 27 ago. 2021.
- [3] TAKEMURA, K.; DEWAELE, A. Isothermal equation of state for gold with a he-pressure medium. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 78, p. 104119, Sep 2008. Disponível em: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.78.104119>. Acesso em: 20 jul. 2021.
- [4] ANGEL, R. J.; ALVARO, M.; GONZALEZ-PLATAS, J. Eosfit7c and a fortran module (library) for equation of state calculations. *Zeitschrift für Kristallographie - Crystalline Materials*, v. 229, n. 5, p. 405–419, 2014. Disponível em: <https://doi.org/10.1515/zkri-2013-1711>. Acesso em: 20 jul. 2021.

APOIO

